



TITLE:

YB\_12のバンド構造(VIII ポスター・セッション,価数揺動状態をめぐる理論の現状,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

播磨, 尚朝; 柳瀬, 章; 糟谷, 忠雄

---

CITATION:

播磨, 尚朝 ...[et al]. YB\_12のバンド構造(VIII ポスター・セッション,価数揺動状態をめぐる理論の現状,科研費研究会報告). 物性研究 1983, 40(2): 60-60

ISSUE DATE:

1983-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90916>

RIGHT:

## YB<sub>12</sub>のバンド構造

東北大理, 大阪府立大総合科学\*

播磨 尚朝, 柳瀬 章\*, 糟谷 忠雄

YB<sub>12</sub>のバンド計算は、SmB<sub>6</sub>とよく似た性質を示すYbB<sub>12</sub>の価数振動状態を研究する上で重要である。YB<sub>12</sub>は、YbB<sub>12</sub>と同じ結晶構造を持つ。立方八面体の頂点に位置する12個のBoronを1つの原子と見なすと、NaCl型の結晶構造である。

計算は、Local Spin Density 近似(L.S.D.A)を用いたAPW法で Potentialを Self consistentにするまで行なっている。相対論的効果は、Koeilling と Harmon (1977)による方法で取り入れてある。Spin-Orbit Interactionは落としてある。

計算されたバンド構造(Fig.)から、金属的であることが知られる。B<sub>12</sub>は-2価、Yは+3価の状態が存在している。伝導電子は1個であり、従って、MB<sub>12</sub>でMが+2価の状態で作ると、半導体あるいは半金属になることが予想される。YbB<sub>12</sub>の場合、帯磁率から求められたYbの価数は+2.75価であり、抵抗は半導体的振舞を示すことが知られている。

Fermi energy (Fig.でE<sub>F</sub>とした点線)にかかる bandは、2つの状態があるが、characterのE(k)依存性はほぼ同じである。E(k)=E<sub>F</sub>の近傍で、Yのdが20%, fが数%, Bのpが40%程度であり、E(k) ≤ E<sub>F</sub>では、Yのdが増え、YのfとBのpが共に減り、E(k) ≥ E<sub>F</sub>になると、その逆の傾向がある。

なお、この計算は、柳瀬、長谷川両氏によるプログラムを用いて行なった。

Figure. YB<sub>12</sub>のバンド構造

